

Энергия адсорбции атомов и молекул рассчитывалась как разность полных энергий продуктов реакции и реагентов. Оценивая результаты, полученные при расчете величины $E_{\text{адс}}$, представленные в таблице можно сделать вывод, что абсолютное значение энергии адсорбции возрастает с ростом электроотрицательности и валентности адатомов. Отрицательные значения энергии адсорбционной связи указывают на то, что система находится в энергетически устойчивом состоянии. Как следует из таблицы, энергия адсорбции $E_{\text{ад}}$ сильно зависит от типа атома, который присоединяется на германеновую поверхность. Так, чем выше сродство к электрону, например, у кислорода, тем энергетически менее выгодна адсорбция.

Список публикаций:

- [1] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. // *Успехи химии*. 2014. Т. 83. Вып. 3. С. 251–279
- [2] Aoki H., Dresselhaus M.S. *Physics of Graphene*. Springer International Publishing Switzerland, 2014
- [3] Герп А.В., Нестоклон М.О., Ясцеевич И.Н. // *ЖЭТФ*, 2015, Том 148, Вып. 1, с. 133 – 139
- [4] M. Houssa, G. Pourtois, V. V. Afanas'ev, and A. Stesmans *Electronic properties of two-dimensional hexagonal germanium* // *Applied Physics Letters* 96, 082111 (2010).
- [5] M. E. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio and G. Le Lay *Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene* // *New J. Phys.* 16: 095002 (2014).
- [6] A. Acun, L. Zhang, P. Bampoulis, M. Farmanbar, Avan Houselt, A. N. Rudenko, M. Lingenfelder, G. Brocks, B. Poelsema, M. I. Katsnelson and H. J. W. Zandvliet *Germanene: the germanium analogue of graphene* // *J. Phys.: Condens. Matter* 27 (2015) 443002 (11pp).
- [7] L. Zhang, P. Bampoulis, A. van Houselt, and H. J. W. Zandvliet *Two-dimensional Dirac signature of germanene* // *Applied Physics Letters* 107, 111605 (2015).

Изучение функциональных групп материалов класса ZIF для специфической сорбции йода

Ерофеева Елена Александровна

Бутова Вера Валерьевна

Южный федеральный университет

Солдатов Александр Владимирович д.ф.-м.н

bulanovaenaa@gmail.com

Металлоорганические каркасные структуры (МОК) [1] – это новый класс пористых материалов, состоящий из ионов металлов, соединённых органическими молекулами-линкерами в высоко-симметричной кристаллической решетке. Эти материалы обладают уникальными свойствами, такими как высокая удельная площадь поверхности (вплоть до 1000-10000 м²/г [2]) и возможность модифицирования структуры под конкретные задачи [2]. МОК применяют для разделения и хранения газов, катализа, адресной доставки лекарств и т.д.

ZIF (от англ. Zeolitic Imidazolate Framework – цеолитные имидазольные каркасы) являются подклассом МОК с топологией цеолитов и высокой удельной площадью поверхности. ZIF применяют для специфической адсорбции и разделения газов [3]. Функциональные группы на молекулах линкеров оказывают сильное влияние на сорбционные свойства получаемого материала. В частности, ZIF с неполярными функциональными группами могут адсорбировать и удерживать неполярные молекулы, тогда как полярные функциональные группы обеспечивают специфическую сорбцию полярных молекул.

В настоящей работе мы сосредоточились на двух изоструктурных ZIF (*рис.1*) - ZIF-65 и ZIF-8 [4-7]. Единственным отличием между ними является функциональная группа линкера: в ZIF-65 – это полярная нитрогруппа, а в ZIF-8 – неполярная CH₃-группа. Это позволило нам изучить влияние полярности функциональной группы на специфические адсорбционные свойства выбранных ZIF в отношении йода.

Образцы были получены разработанным коллективом авторов микроволновым методом согласно опубликованным данным [5, 7]. Полученные образцы были всесторонне охарактеризованы методами порошковой рентгеновской дифракции, инфракрасной и XANES спектроскопии, термогравиметрического анализа (ТГА), пористость образцов была измерена методом сорбции азота при температуре -196 °С, удельная площадь поверхности рассчитана согласно модели БЭТ. Далее оба исследуемые образца были насыщены газообразным йодом [8]. Количество поглощенного йода в образцах определялось методами ТГА и рентгенофлуоресцентного анализа (РФА).

Таким образом, были разработаны микроволновые методики синтеза позволяющие получить наночастицы ZIF-65 и ZIF-8 с высокой удельной площадью поверхности. Синтезированные образцы были протестированы для сорбции йода. Было определено, что ZIF-8 сорбирует йод и удерживает его вплоть до разложения каркаса (400°С), а ZIF-65 при нагревании йод десорбирует.

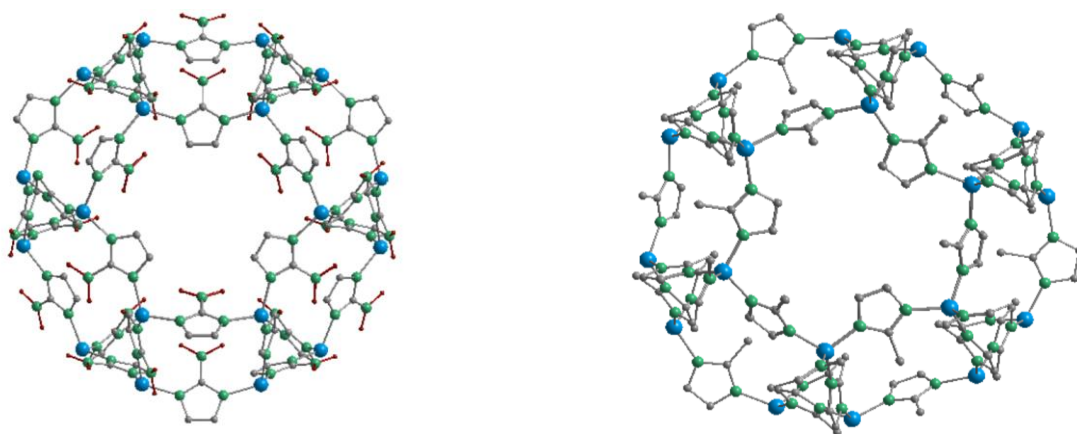


рис.1. Структура ZIF-65 и ZIF-8

Список публикаций:

- [1] Бутова В.В., М.А. Солдатов, А.А. Гуда, К.А. Ломаченко, К. Ламберти, *Металлоорганические каркасные структуры: строение, свойства, методы синтеза и анализа* // *Usp. Khim.* 2016, V. 85. P. 280-307.
- [2] Furukawa H., K. E. Cordova, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi *The Chemistry and Applications of Metal-Organic Frameworks* // *Science* 2013, V. 341. P. 1230444.
- [3] Sava D.F., M.A. Rodriguez, et al. Capture of Volatile Iodine, a Gaseous Fission Product, by Zeolitic Imidazolate Framework-8 // *J. Am. Chem. Soc.* 2011, V. 133(32) P. 12398-12401.
- [4] Park K.S., Z. Ni, et al. Exceptional chemical and thermal stability of zeolitic imidazolate frameworks // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2006, V. 103(27). P. 10186-10191.
- [5] Butova V.V., V.A. Polyakov, E.A. Bulanova, M.A. Soldatov, I.S. Yahia, H.Y. Zahran, A.F. Abd El-Rehim, H.El Garni, A.M. Aboraia, A.V. Soldatov "MW synthesis of ZIF-65 with a hierarchical porous structure" // *Microporous and Mesoporous Materials* 2020, V. 293. P. 109685.
- [6] Tu M., C. Wiktor, et al. Rapid room temperature syntheses of zeolitic-imidazolate framework (ZIF) nanocrystals // *Chem. Commun.* 2014, V. 50(87). P. 13258-13260.
- [7] Vera V. Butova, Andrey P. Budnik, Elena A. Bulanova and Alexander V. Soldatov "New microwave-assisted synthesis of ZIF-8" *Mendeleev Commun.* 2016 26 43–44.
- [8] Butova, V. V., Bulanova, E. A., Polyakov, V. A., Guda, A. A., Aboraia, A. M., Shapovalov, V. V., Zahran, H. Y., Yahia, I. S., Soldatov, A. V. The effect of cobalt content in Zn/Co-ZIF-8 on iodine capping properties // *Inorg. Chim. Acta*, 2019. V. 492, №. P. 18-22.

Квантово-химические расчеты энергетических характеристик диссоциативного захвата электронов молекулами органических кислот

Кильдибаева Гузалия Хамитьяновна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Асфандияров Наиль Лутфурахманович, д.ф.-м.н.

gkildibaeva13@list.ru

Слабые органические кислоты играют важную роль в метаболизме живых организмов, образуя хелатные комплексы с ионами кальция, магния, меди и железа. Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов диссоциативного захвата электронов (МСОИ ДЗЭ) были исследованы лимонная (ЛК) и α -кетаровая (α -КК) кислоты, влияющие на энергетический обмен в цикле Кребса [1]. Данные об энергетике и каналах распада ОИ, полученные методом МСОИ ДЗЭ связаны с энергетикой и продуктами метаболизма веществ в живом организме [2]. С целью интерпретации результатов эксперимента, с использованием программного пакета Gaussian, рассчитаны энергии для пяти структур молекул и анионов методами DFT B3LYP/6-31+G(d) и AM1 [3]. На рис. 1 приведено сравнение наиболее стабильных структур исследованных молекул с наиболее стабильными по полной энергии структурами соответствующих анионов.